

Friedhelm Kuypers

Quantenmechanik

Lehr- und Arbeitsbuch



Friedhelm Kuypers

Quantenmechanik

Friedhelm Kuypers

Quantenmechanik

Lehr- und Arbeitsbuch

WILEY-VCH
Verlag GmbH & Co. KGaA

Autor

Professor Dr. Friedhelm Kuypers

Hedwig-Dransfeld-Weg 14

93055 Regensburg

Deutschland

friedhelm.kuypers@oth-regensburg.de

Titelbild

Das Titelbild soll in aller künstlerischen Freiheit auf den Dualismus Welle-Teilchen hinweisen. Die Blitze auf der Kugel haben keine Bedeutung.

■ Alle Bücher von Wiley-VCH werden sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autoren, Herausgeber und Verlag in keinem Fall, einschließlich des vorliegenden Werkes, für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler irgendeine Haftung.

**Bibliografische Information der
Deutschen Nationalbibliothek**

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

© 2020 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA,
Boschstr. 12, 69469 Weinheim, Germany

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in andere Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieses Buches darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Photokopie, Mikroverfilmung oder irgendein anderes Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen, verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden. Die Wiedergabe von Warenbezeichnungen, Handelsnamen oder sonstigen Kennzeichen in diesem Buch berechtigt nicht zu der Annahme, dass diese von jedermann frei benutzt werden dürfen. Vielmehr kann es sich auch dann um eingetragene Warenzeichen oder sonstige gesetzlich geschützte Kennzeichen handeln, wenn sie nicht eigens als solche markiert sind.

Print ISBN 978-3-527-41380-5

ePDF ISBN 978-3-527-82278-2

ePub ISBN 978-3-527-82277-5

Umschlaggestaltung Grafik-Design Schulz, Fußgönheim

Satz le-tex publishing services GmbH, Leipzig

Druck und Bindung

Gedruckt auf säurefreiem Papier.

Vorwort

Dieses Buch wurde in erster Linie für Physikstudenten geschrieben, aber auch für Studierende der Chemie, der Mathematik und einiger Ingenieurwissenschaften. Das Studium des Buches setzt Kenntnisse in Analysis, linearer Algebra und Klassischer Mechanik voraus. Grundkenntnisse der Wellenlehre und Elektrodynamik sind ebenfalls erforderlich. Auch einfache Einblicke in die Fouriertransformationen und Differentialgleichungen sind angebracht.

Die Quantenmechanik ist wohl das wichtigste Teilgebiet der Physik. Denn ohne Quantenmechanik sind tiefere Einsichten in die Atom-, Kern- und Elementarteilchenphysik, Optik, physikalische Chemie, Festkörperphysik, Halbleitertechnologie, ... unmöglich. Seit der Mitte des 20. Jahrhunderts hat die Quantenmechanik nicht nur für die Grundlagenforschung der Physiker und Chemiker, sondern auch für die moderne Technik eine enorme Bedeutung erhalten: Ohne Quantentheorie wären die meisten technischen Entwicklungen ab der Mitte des 20. Jahrhunderts undenkbar. Der Transistor wurde zur wichtigsten Erfindung des vergangenen Jahrhunderts gewählt, weil er die Basis aller modernen elektronischen Geräte und Technologien ist.

Da es bereits viele Bücher und Skripten zur Quantenmechanik gibt, stellt sich natürlich eine Frage: Wodurch unterscheidet sich dieses Lehrbuch von den anderen – abgesehen natürlich von der Stoffauswahl und vor allem vom individuellen Stil des Autors? Ich will kurz die **Besonderheiten dieses Buches** aufzählen, die mir wichtig erscheinen:

- **Beispiele:** Ohne konkrete Beispiele und ohne selber gerechnete Aufgaben lässt sich eine neue Theorie nur schwerlich nachvollziehen und erlernen. Daher sind 92 vollständig gelöste Beispiele eng in den Lehrstoff eingebunden, um neue Aussagen praxisnah, lebendig und illustrativ zu verdeutlichen und um neue Rechenmethoden einzuüben. Natürlich sind die Beispiele am nützlichsten, wenn der Leser die Lösungen eigenständig erarbeitet. Leser mit wenig Zeit sollten wenigstens eine eigene *Lösungsidee* entwickeln und erst danach die Einzelheiten der Lösung im Buch nachlesen.
- **Aufgaben:** 207 Aufgaben am Ende der Kapitel mit *vollständigen Lösungen* am Ende des Buches haben denselben Zweck. Auch sie sind ein wesentlicher Bestandteil dieses Lehrbuches. An zahllosen Stellen wird im Haupttext auf *konkrete Veranschaulichungen*, auf *Beweise* und auf weitere Angaben in den Aufgaben hingewiesen. Wegen ihrer großen Bedeutung werden die Lösungen genauso sorgfältig und detailliert bearbeitet wie der Haupttext. Die Hilfestellungen in den Lösungen sind umfangreich; typische Anfängerfehler werden benannt. Endergebnisse werden in der Regel erläutert.



Beispiele und Aufgaben, die ich für besonders lehrreich oder für besonders interessant und anregend halte, werden mit einem Schlüssel markiert.

- **Selbststudium:** Zur Entlastung des Haupttextes werden viele Rechnungen und Anwendungen sowie einige nicht zentrale Beweise in die Aufgaben verlagert. Wegen der kompakten

Darstellung im Haupttext und wegen der vielen Beispiele und gelösten Aufgaben ist das Buch zum Selbststudium geeignet.

- **Leitgedanken:** In der Quantenmechanik werden häufig umfangreiche Rechnungen durchgeführt, die den Blick des Anfängers auf die eigentliche Physik etwas verschleiern können. Daher geben eingerahmte Leitgedanken am Ende jedes Kapitels einen relativ ausführlichen, meistens mehrere Seiten langen Überblick über die gelernten *physikalischen* Inhalte – möglichst ohne mathematischen Ballast. Diese verkürzten Übersichten lassen die Physik bisweilen deutlicher zutage treten und ermöglichen eine schnelle Wiedergabe zentraler Aussagen. Sie eignen sich für *Wiederholungen des Stoffes* und für *schnelle Prüfungsvorbereitungen*.
- **Interpretationen:** Die Quantenmechanik beschreibt einzigartige und oftmals geradezu *aberwitzige Phänomene* – mehr noch als die Relativitätstheorie. Viele zentrale Aussagen sind in der klassischen Physik völlig unbekannt und widersetzen sich hartnäckig jeder Veranschaulichung. Beispiele sind der Messprozess, Austauschkräfte, kovalente Bindungen und vor allem die Verschränkung. Vieles bleibt rätselhaft. Zudem existieren seit Jahrzehnten unterschiedliche Interpretationen nebeneinander. Die Rätsel und die verschiedenen Auslegungen tragen wesentlich zur Faszination und zum Reiz der Quantentheorie bei. Der Leser soll und muss natürlich in erster Linie das mathematische und physikalische Handwerk erlernen. Darüber hinaus ist es mir aber auch wichtig, den Leser für diese unvergleichliche Theorie zu begeistern. Die wichtigste Voraussetzung dafür ist sicherlich eine verständliche und klare Beschreibung. Ich will den Leser aber auch motivieren, indem ich das zähe Ringen der Physiker mit ungewöhnlichen Gesetzen und ihre anfänglichen Zweifel schildere. Bei passenden Gelegenheiten gehe ich auf die Eigentümlichkeiten und auf gescheiterte Interpretationsversuche ein.
- **Anwendungen:** Auch Anwendungen wie beispielsweise die Magnetresonanztomographie (MRT), die Quantenkryptographie und die wechselwirkungsfreie Auffindung einer Bombe sollen für die Quantenmechanik begeistern. Es ist geradezu absurd: Die Anwesenheit einer Bombe wird mit Licht detektiert, ohne dass die Bombe auch nur von einem einzigen Photon getroffen wird.
- **Fußnoten:** Fragen, die beim *ersten* Lesen selten auftreten und weiterführende Bemerkungen, die nicht von zentraler Bedeutung sind, werden oft in die Fußnoten verschoben, um den Gedankengang im Haupttext nicht zu unterbrechen. Daher ist die Zahl der Fußnoten relativ hoch. In manchen Fußnoten und klein gedruckten Anmerkungen werden kurze Hinweise auf *spätere* Kapitel gegeben, um wichtige Zusammenhänge und Querverbindungen aufzuzeigen. Anfänger können Randnoten und Verweise auf *nachstehenden* Stoff *problemlos überlesen*. Leser, die den Stoff bereits einmal erarbeitet haben und jetzt wiederholen oder vertiefen, können Nutzen ziehen aus Verknüpfungen und Ähnlichkeiten mit weiter hinten stehenden Inhalten und Aussagen.

Das **Flussdiagramm** auf Seite VIII zeigt dem Leser, welche Kapitel besonders wichtig sind und welche Kapitel außer acht gelassen werden können. Die grundlegenden Kapitel stehen in der mittleren Spalte und sind fett gedruckt; weniger wichtige Kapitel haben eine gestrichelte Umrandung.

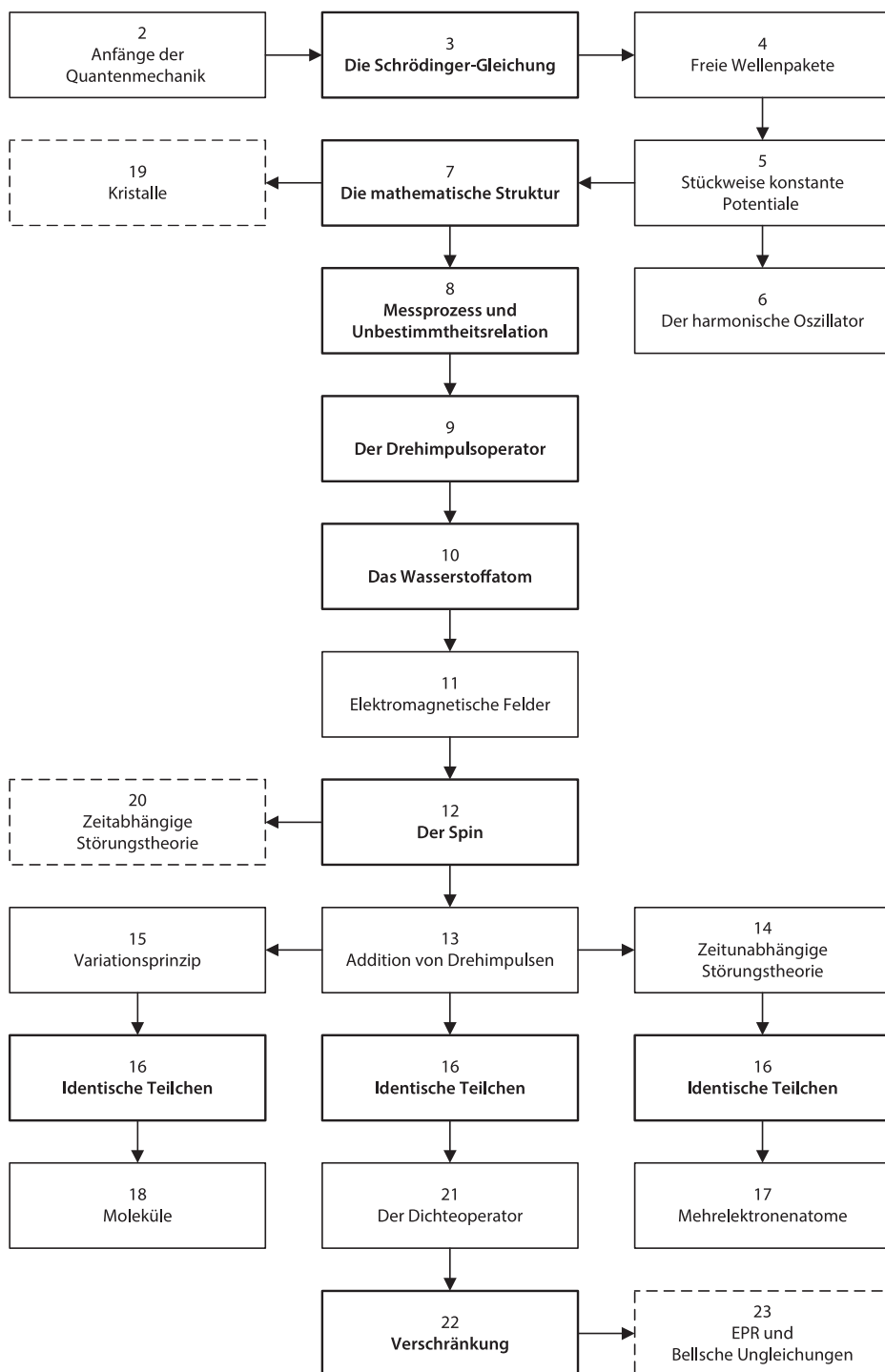
Mein ganz besonderer Dank gilt Prof. Dr. B. Braun von der TH Nürnberg. Er hat das Manuskript sehr sorgfältig gelesen und mir umfangreiche Listen mit Verbesserungsvorschlägen und Fehlern geschickt. Sehr hilfreich waren unsere gemeinsamen Gespräche über fachliche Fragen und über die Didaktik der Quantenmechanik.

Ich lade alle Leser herzlich ein, durch Bemerkungen, Anregungen oder auch durch Fragen zur Verbesserung des Buches beizutragen. Meine E-Mail-Adresse lautet:

friedhelm.kuypers@oth-regensburg.de

Friedhelm Kuypers

Regensburg, im Dezember 2019



Inhaltsverzeichnis

Vorwort V

1	Quantenmechanik und moderne Welt	1
2	Die Anfänge der Quantenmechanik	3
2.1	Plancksches Strahlungsgesetz 1900	4
2.2	Der Photoeffekt 1905	6
2.3	Das Bohrsche Atommodell 1913	9
2.4	Welleneigenschaften der Materie 1924	13
2.5	Der Compton-Effekt 1922	16
2.6	Das Doppelspalt-Experiment	18
2.7	Leitgedanken	25
2.8	Aufgaben	29
3	Die Schrödinger-Gleichung	31
3.1	Aufstellung der Schrödinger-Gleichung 1926	32
3.2	Stationäre Zustände	39
3.3	Orts- und Impulsoperator	43
3.4	Die Kontinuitätsgleichung	53
3.5	Leitgedanken	58
3.6	Aufgaben	64
4	Freie Wellenpakete	69
4.1	Klassische Wellenpakete *	69
4.2	Wellenpakete freier Quantenobjekte	74
4.3	Interferenz von zwei Wellenpaketen *	83
4.4	Leitgedanken	86
4.5	Aufgaben	89
5	Stückweise konstante Potentiale	92
5.1	Unendlich tiefer Potentialtopf	93
5.2	Potentialstufe	104
5.3	Wellenpakete an einer Potentialstufe *	110
5.4	Potentialwall und Tunneleffekt	114
5.5	Endlich tiefer Potentialtopf	124

5.6	Abschließende Bemerkungen	129
5.7	Leitgedanken	131
5.8	Aufgaben	136
6	Der harmonische Oszillator	141
6.1	Lösung mit Potenzreihen	142
6.2	Algebraische Lösung mit Leiteroperatoren	151
6.3	Schwingende Zustände *	156
6.4	Leitgedanken	159
6.5	Aufgaben	162
7	Die mathematische Struktur	167
7.1	Der Hilbertraum	168
7.2	Die Operatoren der Quantenmechanik	178
7.3	Das Ehrenfestsche Theorem	185
7.4	Leitgedanken	190
7.5	Aufgaben	193
8	Messprozess und Unbestimmtheitsrelation	200
8.1	Der Messprozess	201
8.2	Allgemeine Unbestimmtheitsrelation	211
8.3	Unbestimmtheitsrelation für Energie und Zeit	221
8.4	Wechselwirkungsfreie Messung * 1993	229
8.5	Interpretationsprobleme	233
8.6	Leitgedanken	237
8.7	Aufgaben	241
9	Der Drehimpulsoperator	247
9.1	Einführung und Motivation *	248
9.2	Eigenwerte des Drehimpulsoperators	248
9.3	Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators	255
9.4	Leitgedanken	260
9.5	Aufgaben	263
10	Das Wasserstoffatom	267
10.1	Spektrum des Wasserstoffatoms	267
10.2	Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms	276
10.3	Leitgedanken	286
10.4	Aufgaben	289
11	Elektromagnetische Felder	293
11.1	Hamiltonoperator und Eichinvarianz	293
11.2	Homogene Magnetfelder	296
11.3	Der Aharonov-Bohm-Effekt * 1959	299
11.4	Leitgedanken	304
11.5	Aufgaben	306

12	Der Spin	308
12.1	Einführung	309
12.2	Der Stern-Gerlach-Versuch 1922	309
12.3	Spin-1/2-Teilchen	311
12.4	Magnetisches Moment des Spins	319
12.5	Wellenfunktionen mit Spin	324
12.6	Leitgedanken	327
12.7	Aufgaben	330
13	Addition von Drehimpulsen	336
13.1	Einführung und Motivation *	336
13.2	Addition von zwei Spins mit $s = \frac{1}{2}$	337
13.3	Addition von Bahndrehimpuls und Spin	341
13.4	Allgemeine Addition von zwei Drehimpulsen	345
13.5	Leitgedanken	346
13.6	Aufgaben	350
14	Zeitunabhängige Störungstheorie	352
14.1	Einführung	352
14.2	Störung nicht entarteter Niveaus	353
14.3	Störung entarteter Niveaus	360
14.4	Feinstruktur des Wasserstoffatoms	364
14.5	Der Zeeman-Effekt	371
14.6	Leitgedanken	377
14.7	Aufgaben	384
15	Variationsprinzip	388
15.1	Das Variationsprinzip	388
15.2	Leitgedanken	393
15.3	Aufgaben	394
16	Identische Teilchen	396
16.1	Unterscheidbare Teilchen	397
16.2	Identische Teilchen	398
16.3	Symmetrisierung und Antisymmetrisierung	406
16.4	Leitgedanken	421
16.5	Aufgaben	424
17	Mehrelektronenatome	429
17.1	Das Heliumatom	429
17.2	Das Periodensystem *	436
17.3	Die Hartree-Methode	440
17.4	Leitgedanken	444
17.5	Aufgaben	447

18	Moleküle	449
18.1	Das ionisierte Wasserstoffmolekül	449
18.2	Das Wasserstoffmolekül	454
18.3	Hybridorbitale *	459
18.4	Van-der-Waals-Kräfte *	461
18.5	Leitgedanken	464
18.6	Aufgaben	469
19	Kristalle	470
19.1	Klassische Frequenzaufspaltung	470
19.2	Energiebänder in Kristallen	471
19.3	Leitgedanken	481
19.4	Aufgaben	485
20	Zeitabhängige Störungstheorie	487
20.1	Allgemeine Störungsentwicklung	488
20.2	Absorption und induzierte Emission	494
20.3	Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge	505
20.4	Spontane Emission und Einsteinkoeffizienten	508
20.5	Plötzliche Parameteränderung *	513
20.6	Leitgedanken	516
20.7	Aufgaben	522
21	Der Dichteoperator	525
21.1	Der Dichteoperator reiner Gesamtheiten	525
21.2	Der Dichteoperator gemischter Gesamtheiten	526
21.3	Leitgedanken	537
21.4	Aufgaben	539
22	Verschränkung	543
22.1	Verschränkung	544
22.2	No-Cloning-Theorem 1982	551
22.3	Verschränkung und Doppelspalt-Experiment	555
22.4	Die Dekohärenz-Theorie *	562
22.5	Quantenkryptographie *	571
22.6	Leitgedanken	576
22.7	Aufgaben	581
23	EPR und Bellsche Ungleichungen	585
23.1	Das EPR-Paradoxon 1935	585
23.2	Die Bellschen Ungleichungen 1964	589
23.3	Leitgedanken	594
23.4	Aufgaben	597

Lösungen 599

Lösungen 2: Die Anfänge der Quantenmechanik	599
Lösungen 3: Die Schrödinger-Gleichung	601
Lösungen 4: Freie Wellenpakete	611
Lösungen 5: Stückweise konstante Potentiale	618
Lösungen 6: Der harmonische Oszillator	633
Lösungen 7: Die mathematische Struktur	647
Lösungen 8: Messprozess und Unbestimmtheitsrelation	658
Lösungen 9: Der Drehimpulsoperator	677
Lösungen 10: Das Wasserstoffatom	689
Lösungen 11: Elektromagnetische Felder	702
Lösungen 12: Der Spin	707
Lösungen 13: Addition von Drehimpulsen	725
Lösungen 14: Zeitunabhängige Störungstheorie	729
Lösungen 15: Variationsprinzip	740
Lösungen 16: Identische Teilchen	744
Lösungen 17: Mehrelektronenatome	757
Lösungen 18: Moleküle	761
Lösungen 19: Kristalle	764
Lösungen 20: Zeitabhängige Störungstheorie	768
Lösungen 21: Der Dichteoperator	775
Lösungen 22: Verschränkung	782
Lösungen 23: EPR und Bellsche Ungleichungen	787

Literaturverzeichnis 790**Stichwortverzeichnis** 791

1 Quantenmechanik und moderne Welt

Die Quantenmechanik wird heute nicht nur für Studierende der Physik, Mathematik und Chemie unterrichtet, sondern auch für Studierende der Nano- und Halbleitertechnologien, der Materialwissenschaften ... Sie hat Eingang gefunden in die Lehrpläne der Gymnasien. An Technischen Hochschulen und Fachhochschulen werden einführende Kurse gegeben. Das ist bemerkenswert angesichts der Tatsache, dass die Quantenmechanik bis in die 50er Jahre meistens nur in der Grundlagenforschung der Physiker und Chemiker verwendet wurde.

In den letzten zwei Generationen hat die experimentelle Quantenphysik enorme Fortschritte erzielt und neue, ungeahnte Möglichkeiten eröffnet. Zentrale Überlegungen und Ideen, die man früher nur in Gedankenexperimenten hinterfragen oder bestätigen konnte, lassen sich heute in realen Experimenten überprüfen. Man kann *einzelne* Photonen und *einzelne* Teilchen erzeugen und ihr Verhalten beobachten und manipulieren. Die Relevanz der Quantenmechanik für die modernen Technologien ist kaum zu überschätzen und begann vor allem mit dem Transistor (in den 1940er Jahren) und dem Laser (1960). Heute benutzen die meisten modernen Geräte die Gesetze der Quantenmechanik: Computer, Handys, Navigationsgeräte, LCD-Fernseher, LEDs, CD- und DVD-Spieler, Solaranlagen, Strichcode-Leser, Kernspintomographen, Die Liste ist nahezu endlos. Der Leser mag sich selber ausdenken, wie die Welt heute wohl ohne elektronische Geräte und ohne Informatiker aussehen würde.

Die Quantenmechanik eröffnet neue Möglichkeiten für die Informationstechnologien. In der *Quanteninformatik* spielen die Überlagerungen und Verschränkungen von Zuständen eine zentrale Rolle. Die bereits in der Praxis eingesetzte Quantenkryptographie deckt jeden Lauschangriff auf die Schlüsselübertragung auf. Die Quantenteleportation überträgt Zustände von einem Quantenobjekt auf ein anderes. In Zukunft sollen Quantencomputer bestimmte Rechenaufgaben viel schneller lösen als klassische Computer.

In den hochentwickelten Industriestaaten beruhen über 25 % des Bruttoinlandsproduktes, also des Gegenwertes von allen erzeugten Waren und allen erbrachten Dienstleistungen, auf der Quantentheorie. Im 21. Jahrhundert wurden in der EU und in vielen Ländern milliardenschwere Förderprogramme für die Quantentechnologien aufgelegt. Zwanglos können wir feststellen:

Mit der Quantenmechanik kann man gute Geschäfte machen und viel Geld verdienen.

Mit Kenntnissen der Quantenmechanik kann man sogar Bundeskanzlerin werden.

Sehr spektakulär, ja fast schon unglaublich sind neue Untersuchungen in der „Quantenbiologie“: 2010 behaupteten Wissenschaftler am Berkeley Lab in Kalifornien, stabile *Verschränkungen in biologischen Systemen* entdeckt zu haben. Die Verschränkungen sollen u. a. die hohe Effizienz der Photosynthese ermöglichen, bei der Pflanzen und Bakterien Sonnenenergie in chemische Energie umwandeln. Die Aussage, dass Verschränkungen in biologischen Systeme

men bei Zimmertemperaturen und zahlreichen Umgebungseinflüssen existieren, ist höchst erstaunlich; denn die Verschränkung gilt in der Regel als eine sehr zerbrechliche und exotische Eigenschaft und kann im Labor nur kurzfristig im Ultravakuum und bei Temperaturen in der Nähe des absoluten Nullpunktes bestehen. Beim Quantencomputer ist die Aufrechterhaltung von Verschränkungen ein ganz zentrales Problem.

Trotz aller Zweifel an Verschränkungen in der belebten Natur wird seit einigen Jahren in vielen Labors ernsthaft untersucht, ob die Verschränkung und andere quantenmechanische Effekte eine tragende Rolle in der Biologie spielen.

Vögel nehmen das Magnetfeld der Erde wahr. Auch hier gibt es neuerdings ernst zu nehmende Hinweise für Quanteneffekte und Verschränkungen im Magnetfeldkompass der Vögel.

Ich hoffe, diese wenigen Erläuterungen wecken die Neugier des Lesers und motivieren ihn für das Studium der einzigartigen und oft absonderlichen Welt der Quanten.

2 Die Anfänge der Quantenmechanik

Am Ende des 19. Jahrhunderts gehörten die Spektren der Wärmestrahlung und der Atome zu den größten Rätseln der Physik. Es dauerte etwa 30 Jahre, bis man sich nach vielen Irrungen von den Gesetzen der klassischen Physik frei machte und die Probleme mit einer völlig neuartigen Theorie, eben der Quantenmechanik in den Griff bekam. Das erste Drittel des 20. Jahrhunderts war wohl die aufregendste Zeit in der Physikgeschichte.

Dieses einfache und knapp geschriebene Kapitel beschreibt die wichtigsten Entwicklungen, die in den Jahren 1900–1924 den Aufbau der Quantenmechanik vorbereiteten. Zahlreiche Zitate verdeutlichen das oftmals verzweifelte Ringen der Physiker um die richtige Theorie sowie ihr ungläubiges Staunen angesichts völlig neuer Ideen. Besonders wichtig sind die de-Broglie-Gln. (2.4–1a/b) und das Doppelspalt-Experiment.

- 2.1 *Plancksches Strahlungsgesetz:* Max Planck konnte das Spektrum der Wärmestrahlung im Jahre 1900 nur durch den bahnbrechenden Kunstgriff erklären, dass die Wärmestrahlung in *diskreten* Portionen abgegeben und absorbiert wird. Dabei entdeckte er das Plancksche Wirkungsquantum h . Dies war die Geburtsstunde der Quantenmechanik.
- 2.2 *Der Photoeffekt:* 1905 erklärte Albert Einstein den Photoeffekt, also die Freisetzung von Elektronen aus bestrahlter Materie. Dabei schlug er anstelle der Planckschen Hypothese, wonach Emission und Absorption der Wände eines Körpers quantisiert sind, vor, dass die Strahlung selbst quantisiert ist, also aus Photonen mit der Energie $E = hf$ besteht.
- 2.3 *Das Bohrsche Atommodell:* Im Rutherfordschen Atommodell von 1911 laufen die Elektronen um einen positiv geladenen Kern. Nach der klassischen Physik müssten die beschleunigten Elektronen aufgrund von Strahlungsverlusten sehr schnell in den Kern stürzen. 1913 konnte Niels Bohr dieses Problem lösen, indem er den Bahndrehimpuls durch die postulierte Gleichung $m_e r v = n h / (2 \pi)$ quantisierte und so nur bestimmte, strahlungslose Elektronenbahnen zuließ. Das Modell kann nur das Wasserstoffspektrum erklären.
- 2.4 *Welleneigenschaften der Materie:* Nach der Einsteinschen Deutung des Photoeffektes hat Licht nicht nur Wellen-, sondern auch Teilcheneigenschaften. 1924 vermutete Louis de Broglie, dass Quantenobjekte, die man bis dahin für Teilchen gehalten hatte, umgekehrt auch Welleneigenschaften haben. Danach gilt:

$$E = hf = \hbar \omega \quad p = h/\lambda = \hbar k \quad (2.4-1a/b)$$

- 2.5 *Der Compton-Effekt:* Compton beschoss nahezu freie Elektronen mit Röntgenstrahlen und bestätigte die Gln. (2.4–1a/b) und die Quantennatur der Röntgenstrahlung.
- 2.6 *Das Doppelspalt-Experiment:* Alle Quantenobjekte haben zugleich Teilchen- und Welleneigenschaften. Dieser Dualismus zeigt sich im Doppelspalt-Experiment besonders deutlich. Photonen oder Elektronen durchlaufen *als Wellen beide Spalte zugleich und*

agieren beim punktförmigen Aufschlag auf dem Schirm wie Teilchen. Ein Interferenzmuster tritt nur auf, wenn der Weg der Elektronen nicht registriert wird. Ortskenntnis und Interferenz schließen also einander aus.

2.1 Plancksches Strahlungsgesetz 1900

Warme Körper geben eine **Wärme- oder Temperaturstrahlung** ab, deren spektrale Verteilung und deren gesamte Strahlungsleistung vom Absorptionsgrad der Oberfläche und vor allem von der Temperatur abhängen.

Am einfachsten lässt sich die Strahlung von schwarzen Körpern untersuchen, also von Körpern, die alle von außen einfallende Strahlung vollständig absorbieren und daher nur von ihnen selbst erzeugte Strahlung aussenden. *Die Wärmestrahlung schwarzer Körper hängt nur von der Temperatur ab und nicht von Materialeigenschaften.*

Perfekt schwarze Körper lassen sich nur durch Hohlräume mit einer kleinen Öffnung und einer dunklen inneren Oberfläche realisieren. Sollte ein einfallender Strahl zufällig wieder aus der Öffnung austreten, so hat er nach vielen inneren Reflexionen fast keine Energie mehr. Durch die Öffnung tritt keine reflektierte Fremdstrahlung aus, sondern nur die vom Körper selbst erzeugte Wärmestrahlung.

Ende des 19. Jahrhunderts maßen Lummer und Pringsheim die Energieverteilung im Spektrum der Wärmestrahlung schwarzer Körper. Sie beheizten die Wände eines Hohlraumes und untersuchten die durch die Öffnung austretende Strahlung. Abbildung 2.1–1 zeigt die gemessene spektrale Leistungsdichte Φ_λ . Die Bedeutung von Φ_λ ergibt sich aus folgender Aussage:

$\Phi_\lambda d\lambda$ = Leistung, die von einer ebenen, *schwarzen* Fläche A bei der Temperatur T im Wellenlängenbereich $[\lambda, \lambda + d\lambda]$ abgestrahlt wird.

Viele Physiker versuchten, die gemessenen Kurven theoretisch zu erklären. Vergeblich. Im Jahre 1900 konnte Max Planck die experimentellen Befunde zunächst nur durch eine *empirisch* gefundene Gleichung wiedergeben. Er entdeckte die **Plancksche Strahlungsformel**:

$$\Phi_\lambda = \frac{2\pi h c^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1} A \quad (2.1-1)$$

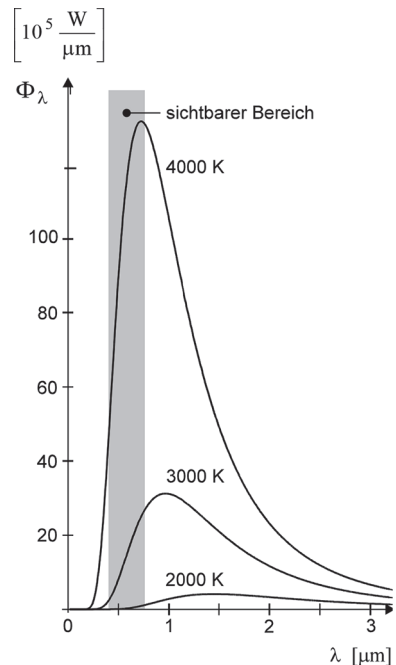


Abb. 2.1–1 λ -Abhängigkeit der spektralen Leistungsdichte eines schwarzen Strahlers bei drei verschiedenen Temperaturen.

mit der Boltzmann-Konstanten ¹

$$k_B = 1,380\,649 \cdot 10^{-23} \text{ J/K (exakt)} \approx 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J/K und mit}$$

$$c = 2,997\,924\,58 \cdot 10^8 \text{ m/s (exakt)} \approx 2,998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

T = absolute Temperatur A = ebene Fläche des Strahlers.

In der Gleichung wird das **Plancksche Wirkungsquantum** h als eine neue Naturkonstante eingeführt. Das Wirkungsquantum h hat die Dimension einer Wirkung (Energie · Zeit) und ist *die* zentrale Größe der Quantenmechanik. Die Strahlungsformel (2.1–1) gibt die experimentellen Ergebnisse richtig wieder für den exakten, im November 2018 festgelegten Wert

$$h = 6,626\,070\,15 \cdot 10^{-34} \text{ J s (exakt)} \approx 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \quad (2.1-2)$$

Theoretisch konnte Max Planck die Strahlungsformel Gl. (2.1–1) zwei Monate später nur ableiten, indem er sich die Atome der Hohlraumwände als harmonische Oszillatoren vorstellte (soweit war er noch im Rahmen der klassischen Physik) und dann in einer bahnbrechenden *Hypothese* annahm, dass *die Hohlraumwände die Energie nicht kontinuierlich emittieren und absorbieren, sondern nur in Quanten mit der Energie*

$$E = h f \quad (2.1-3)$$

Die ausgetauschten Energien $E = h f$ sind also gequantelt. Die Hypothese sagt nicht, dass das Licht selbst oder die Oszillatoren quantisiert sind, sondern nur, dass der Energieaustausch zwischen Wänden und Strahlung – aufgrund einer unbekannten Gesetzmäßigkeit – quantisiert ist.² Die Energiepakete mit der Energie $h f$ heißen Lichtteilchen oder **Photonen**.³

1) Im November 2018 wurden die letzten vier Basiseinheiten Kilogramm, Coulomb, Kelvin und mol durch Kopplung an die vier Naturkonstanten h, e_0, k_B, N_A für alle Ewigkeit festgelegt. Zuvor waren bereits die ersten zwei Basiseinheiten Sekunde und Meter durch Kopplung an $\Delta\nu_{Cs}$ und c sowie die Basiseinheit Candela der Lichtstärke fest vereinbart worden. ($\Delta\nu_{Cs} = 9,192\,631\,770 \cdot 10^9$ Hz ist die Frequenz der Strahlung, die beim Übergang zwischen den zwei Hyperfeinstrukturniveaus des Grundzustandes von $^{133}_{55}\text{Cs}$ auftritt.) Die sieben Naturkonstanten legen die sieben Basiseinheiten Sekunde, Meter, Kilogramm, Coulomb, Kelvin, mol und Candela eindeutig und für immer unveränderlich fest.

2) Max Planck (Nobelpreis 1919) hat nur den Energieaustausch zwischen Oszillatoren und Strahlung diskret angesetzt, wobei er selbst diesen Ansatz als eine formale Angelegenheit ansah, der er keine tiefere physikalische Bedeutung zugestand. Er schrieb über seinen Ansatz: „... Akt der Verzweiflung..., dass ich unter allen Umständen, koste es was es wolle, ein positives Resultat herbeiführen müsste.“

Beachte: Ein diskreter Energieaustausch zwischen Strahlung und Wänden besagt nicht, dass die Strahlung selber quantisiert ist – so wie die schrittweise Entleerung einer Badewanne mit einem Eimer nicht anzeigt, dass das Wasser nur in diskreten Portionen existiert. Erst Einstein unterstellte 1905 die Quantisierung des Lichtes.

1985 schrieb der Physiker A. Pais zur Planckschen Hypothese die anerkennenden Sätze: „Daher bestand die einzige Rechtfertigung für die ... Verzweiflungsschritte darin, dass sie ihm das gewünschte Resultat lieferten. Seine Beweisführung war verrückt, doch hatte diese Verrücktheit jene göttliche Qualität, die nur die größten Persönlichkeiten in Zeiten des Übergangs der Wissenschaft geben können. Dadurch wurde Planck, der von Natur aus konservativ eingestellt war, in die Rolle eines Revolutionärs wider Willen gedrängt. Tief im Denken und den Vorurteilen des 19. Jahrhunderts verwurzelt, vollführte er den ersten gedanklichen Bruch, der die Physik des 20. Jahrhunderts so völlig anders erscheinen lässt als jene der vergangenen Zeit.“

3) Die relativistischen Photonen kommen in allen Büchern der nicht relativistischen Quantenmechanik vor, weil nur die nichtrelativistischen Eigenschaften der Photonen behandelt werden – vor allem die Polarisation.

Die Plancksche Hypothese revolutionierte das Weltbild der Physik und markierte die Geburtsstunde der Quantenmechanik. Allerdings war sie den Physikern anfangs äußerst suspekt; keiner erkannte ihren ernsten Hintergrund. Selbst Max Planck sah diese Hypothese nur als eine Arbeitshypothese, als einen Kunstgriff an. Die Größe h war für ihn nur eine Hilfsgröße; daher der Buchstabe h . Diese ablehnende Einstellung änderte er auch nicht, als Albert Einstein 1905 das elektromagnetische Feld selbst quantisierte und den Photoeffekt mit der Einführung von Lichtteilchen und mit der Gl. (2.1–3) erklären konnte.

2.2 Der Photoeffekt ¹⁹⁰⁵

Im Jahre 1887 entdeckte Heinrich Hertz den sog. **Photoeffekt**. Hertz *bestrahlte eine Zinkplatte (Photokathode) mit ultravioletttem Licht und beobachtete den Austritt von Elektronen*. Abbildung 2.2–1 zeigt einen Versuchsaufbau: Eine metallische Photokathode und eine Anode befinden sich in einem evakuierten Glaskolben und sind mit ungewöhnlicher Polung an eine Spannungsquelle angeschlossen: Der Pluspol ist mit der Kathode und der Minuspol mit der Anode verbunden. Daher erreichen nur diejenigen aus der Kathode herausgeschlagenen Elektronen die Anode und erzeugen einen Strom im Amperemeter A, deren kinetische Energie beim Austritt aus der Kathode mindestens so groß ist wie die potentielle Energie $e_0 U$ im elektrischen Feld. Dabei sind U die angelegte Gegenspannung und

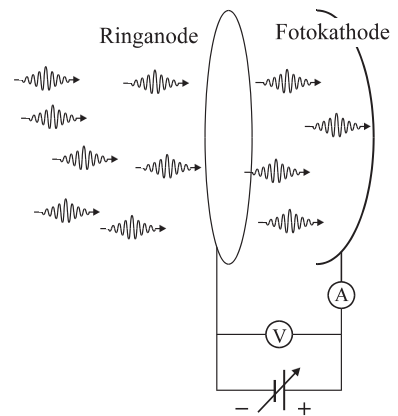


Abb. 2.2–1 Anode und Kathode befinden sich in einem evakuierten Glaskolben.

$$e_0 = 1,602\,176\,634 \cdot 10^{-19} \text{ C (exakt)} \approx 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

die Elementarladung. Die kleinste Gegenspannung U , bei der kein Strom im Amperemeter gemessen wird, heißt **Bremsspannung** U_B .

Im **Experiment** werden die Intensität und die Frequenz f des (nahezu) monochromatischen Lichtes sowie die Spannung U geändert. Dabei werden folgende Beobachtungen gemacht:

- Sogar bei verschwindender Gegenspannung ($U = 0$) setzt die Strahlung bei Frequenzen unterhalb einer bestimmten **Grenzfrequenz** f_G keine Elektronen frei – auch nicht bei langer Bestrahlungszeit oder großer Intensität.
- Die Zahl der pro Sekunde freigesetzten Elektronen steigt mit der Intensität der Strahlung.
- Sogar bei sehr schwacher Strahlung werden *die ersten Elektronen ohne messbare Zeitverzögerung* τ ausgelöst ($\tau < 10^{-9} \text{ s}$).
- Die Bremsspannung U_B hängt nicht von der Intensität der Strahlung ab und steigt linear mit der Frequenz f der Strahlung. Mit anderen Worten: *Die kinetische Energie der herausgeschlagenen Elektronen wächst linear mit der Frequenz der Strahlung.*

Diese experimentellen Befunde können klassisch nicht erklärt werden. Denn nach der **klassischen Theorie** entziehen die Leitungselektronen im Metall der Strahlung kontinuierlich Energie. Irgendwann übertrifft die wachsende Elektronenenergie die **Austrittsarbeit** W_A , die zum Verlassen des Metalls benötigt wird.⁴ Daher gibt es keine untere Grenzfrequenz für die Freisetzung von Elektronen. Bei sehr schwachen Intensitäten sollte es allerdings einige Zeit dauern, bis die ersten Elektronen freigesetzt werden. Weiterhin sollte nach der klassischen Theorie die kinetische Energie der abgelösten Elektronen mit der Intensität der Strahlung steigen und nicht von der Frequenz f abhängen.

Beispiel 2.2-1 Klassische Zeitverzögerung

Licht mit der Intensität $I = 1 \text{ W/m}^2$ trifft auf eine Aluminiumplatte, deren Austrittsarbeit $W_A = 4,08 \text{ eV} \approx 6,5 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ beträgt. Schätze mit der klassischen Theorie die Zeit t ab, die nach Strahlungsbeginn bis zur Freisetzung der ersten Photoelektronen verstreicht.

Hinweis: Den Atomradius nehmen wir typischerweise mit $r = 10^{-10} \text{ m}$ an.

Lösung:

In der Zeit t muss die Austrittsarbeit auf ein Aluminiumatom eingestrahlt werden:

$$W_A = 1 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \cdot \pi 10^{-20} \text{ m}^2 \cdot t \approx 3,14 \cdot 10^{-20} \text{ W} \cdot t$$

$$\Rightarrow t \approx \frac{6,5 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{3,14 \cdot 10^{-20} \text{ W}} \approx 21 \text{ s}$$

Daher kann nach der klassischen Theorie der Austritt der ersten Elektronen sehr lange dauern – im Widerspruch zu den Experimenten.

Im Jahre 1900 hatte Max Planck die Wärmestrahlung erklärt, indem er die Emission und Absorption der Strahlung an den Strahlerwänden nicht kontinuierlich, sondern in Form von Energiequanten unterstellte. Albert Einstein konnte den Photoeffekt im Jahre 1905 erklären, indem er die Plancksche Quantenhypothese erweiterte und annahm, dass *das Licht selbst quantisiert* ist. Nach seiner Meinung ist die Energie des Lichtes nicht kontinuierlich im Raum verteilt, sondern in einzelnen Teilchen konzentriert. Elektromagnetische Strahlung mit der Frequenz f besteht aus Photonen mit der Energie

$$E = hf = \hbar\omega$$

$$\text{mit } h = 6,626\,070\,15 \cdot 10^{-34} \text{ J s (exakt)} \approx 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \quad (2.2-1)$$

$$\Rightarrow \hbar := \frac{h}{2\pi} \approx 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \quad (2.2-1')$$

4) Die Austrittsarbeit von Zink beträgt 4,34 eV. Heute bestehen die Photokathoden meistens aus einem Alkalimetall; hier fällt die Austrittsarbeit von 2,2 eV bei Li ($\lambda_G = 564 \text{ nm}$) bis auf 1,94 eV bei Cs ($\lambda_G = 639 \text{ nm}$). Übrigens sind die Ionisierungsenergien der Alkalimetalle – sie werden benötigt, um ein Elektron aus einem einzelnen Atom herauszuholen – jeweils etwa doppelt so groß wie W_A .

$\hbar$ wird zuweilen „reduziertes Plancksches Wirkungsquantum“ genannt.⁵ Bei der Absorption gibt ein Photon seine Energie hf vollständig an das getroffene Leitungselektron ab. Wenn diese Energie die Austrittsarbeit W_A übertrifft, verlässt das Elektron die Kathode mit der kinetischen Energie⁶

$$\frac{m_e}{2} v^2 = hf - W_A$$

Ein ausgetretenes Elektron kann die negativ geladene Anode nicht erreichen, falls seine kinetische Energie kleiner ist als die potentielle Energie des elektrischen Feldes zwischen Kathode und Anode:

$$\frac{m_e}{2} v^2 = hf - W_A < e_0 U \quad (2.2-2)$$

Daher gilt für die Bremsspannung, also für die kleinste Spannung, bei der kein Strom fließt:

$$U_B = \frac{h}{e_0} f - \frac{W_A}{e_0} \quad (2.2-3)$$

Die experimentellen Beobachtungen können nun erstaunlich einfach erklärt werden:

- Bei der Grenzfrequenz f_G , die laut Definition bei verschwindender Bremsspannung ($U_B = 0$) gemessen wird, ist die Photonenenergie gleich der Austrittsarbeit: $hf_G = W_A$
- Jedes Lichtteilchen (Photon) wird von einem einzelnen Elektron vollständig absorbiert. Daher ist die Zahl der pro Sekunde herausgeschlagenen Elektronen proportional zur Lichtintensität.
- Auch bei schwacher Lichtintensität werden die ersten Elektronen ohne Zeitverlust freigesetzt.
- $U_B(f)$ ist eine lineare Funktion der Frequenz mit der Steigung h/e_0 (siehe Abb. 2.2-2).

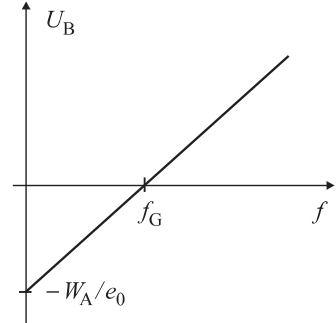


Abb. 2.2-2 Die lineare Funktion $U_B(f)$ schneidet die Abszisse bei der Grenzfrequenz f_G . Messungen erfolgen nur im Bereich $f \geq f_G$.

5) Einsteins Interpretation wurde anfangs kaum ernst genommen. Noch 1913 schrieb Planck in einem Gutachten, in dem er Einstein überschwänglich lobte: „Zusammenfassend kann man sagen, dass es unter allen großen Problemen, an denen die moderne Physik so reich ist, kaum eines gibt, zu dem nicht Einstein in bemerkenswerter Weise Stellung genommen hätte. Dass er in seinen Spekulationen auch einmal über das Ziel hinaus geschossen sein mag, wie z. B. in seiner Hypothese der Lichtquanten, wird man ihm nicht allzu schwer anrechnen dürfen. Denn ohne ein Risiko zu wagen, lässt sich auch in der exaktesten Naturwissenschaft keine wirkliche Neuerung einführen.“ Bis zur Durchführung des Compton-Effektes 1922 glaubten nur wenige Physiker an Lichtquanten.

6) Für Leser, die sich mit der Fermi-Dirac-Statistik auskennen, gebe ich ergänzende Anmerkungen: Am absoluten Nullpunkt der Temperatur ($T = 0$) sind im Leitungsband eines Metalls alle Energieniveaus bis zur Fermi-Energie E_F voll besetzt und alle Energieniveaus oberhalb von E_F sind leer. (Bei Temperaturen $T > 0$ wird die Fermikante „aufgeweicht“ und einige Elektronen haben Energien etwas oberhalb E_F .) Die Austrittsarbeit W_A eines Metalls ist die Energie, die ein Elektron mindestens aufnehmen muss, um das Metall zu verlassen. Die Elektronen mit minimaler, erforderlicher Energieaufnahme sitzen an der Fermikante.

Elektronen des Leitungsbandes, deren Energie $E = E_F - \Delta E$ kleiner ist als E_F ($\Delta E > 0$), müssen die größere Energie $W_A + \Delta E$ aufnehmen, um das Metall zu verlassen. Aus diesem Grund haben die abgelösten Elektronen verschiedene kinetische Energien; am größten ist die kinetische Energie derjenigen abgelösten Elektronen, die von der Fermikante kommen. Bei der Bremsspannung kommen selbst diese schnellsten Elektronen nicht bis zur Anode.

Der Photoeffekt ermöglicht die Messung der Austrittsarbeit W_A und des Planckschen Wirkungsquantums h . Dabei wird die lineare Funktion $U_B(f)$ mit Hilfe von mehreren Messpunkten im Bereich $f \geq f_G$ ermittelt (siehe Abb. 2.2–2). Die Steigung $e_0 \Delta U_B / \Delta f$ ist das Wirkungsquantum h und der Schnittpunkt mit der Ordinate liefert die Austrittsarbeit $W_A = -e_0 U_B$.

2.3 Das Bohrsche Atommodell ¹⁹¹³

Das von leuchtenden Stoffen ausgehende Licht wurde gegen Ende des 19. Jahrhunderts mit Brechung an Prismen und mit Interferenz an Gittern genau untersucht. Dabei stellte man fest:

- Glühende Festkörper, leuchtende Flüssigkeiten und stark verdichtete, leuchtende Gase senden Licht mit kontinuierlichen Spektren aus.
- Verdünnte, leuchtende Gase senden Linienspektren mit diskreten Farben aus. Die Frequenzen der Linien sind charakteristisch für das emittierende Atom und können daher in der Spektralanalyse zum Nachweis oder zur Identifizierung von Atomen verwendet werden.

1884 entdeckte der Basler Lehrer J.J. Balmer auf empirischem Weg eine Gleichung für das Wasserstoffspektrum. J.R. Rydberg und W. Ritz fanden etwas später – ebenfalls *empirisch* – die allgemeinere **Rydberg-Ritz-Gleichung**. Danach gilt für die Wellenlänge der Spektrallinien

$$\frac{1}{\lambda} = Ry \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{mit } n > m \quad (2.3-1)$$

mit der sog. **Rydberg-Konstanten**

$$Ry = 1,097\,373\,156\,850\,8(65) \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}} \approx 1,097 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}} \quad (2.3-2)$$

Die eingeklammerten Ziffern bezeichnen die Unsicherheit in den letzten zwei Stellen. Ry hat die relative Standardunsicherheit $5,9 \cdot 10^{-12}$ und ist damit – nach dem gyromagnetischen Faktor g des Elektrons (siehe Gl. (12.4–3c)) – die *am exaktesten gemessene Naturkonstante*. (Nach Gl. (2.3–19) ist Ry eine Funktion anderer Naturkonstanten.)

Wegen der guten Übereinstimmung der Rydberg-Ritz-Gleichung mit experimentellen Ergebnissen suchten die Forscher nach einem Atommodell, das mit der Rydberg-Ritz-Gleichung verträglich ist. Man wusste anfangs des 20. Jahrhunderts, dass der Atomradius etwa $10^{-10} \text{ m} = 0,1 \text{ nm}$ beträgt und dass Atome Elektronen enthalten, die viel leichter sind als die Atome.

1903 schlug J.J. Thomson, der 1897 die Elektronen entdeckt hatte, ein Atommodell vor, in dem die negativen, ruhenden Elektronen in einer positiven Ladungsverteilung eingebettet sind wie Rosinen in einem Teig (Rosinenkuchen-Modell). Leider konnte das Thomson-Modell die gemessenen Spektren nicht erklären.

In den Jahren 1906–1913 beschossen E. Rutherford und seine Mitarbeiter verschiedene, nur wenige μm dünne Metallfolien mit α -Teilchen. Nach dem Thomsonschen Atommodell sollten die α -Teilchen die Goldatome ohne große Ablenkung durchfliegen, da die atomare Masse laut Thomson homogen in den Atomen verteilt ist.

Rutherford und seine Studenten zählten die Zahl der gestreuten α -Teilchen als Funktion des Ablenkungswinkels. Dazu verwendeten sie einen kleinen Szintillationsschirm, der beim Aufschlag eines α -Teilchens kurz aufblitzte und auf einer Kreisbahn um die Metallfolie geschwenkt wurde. Insgesamt mussten einige hunderttausend Blitze registriert werden. Da die α -Teilchen (fast) *ohne Energieverlust* und teilweise um bis zu 180° (Rückwärtsstreuung) abgelenkt wurden, konnten sie nicht an den sehr leichten Elektronen, sondern nur an schweren Teilchen gestreut werden. Im Jahre 1911 konnte Rutherford die Zählraten sehr überzeugend und genau mit seinem **Rutherford'schen Atommodell** erklären:⁷

- Nahezu die gesamte Masse der Atome ist in einem kleinen, positiv geladenen Atomkern mit Radius $r < 4 \cdot 10^{-14}$ m konzentriert.
- Außerhalb dieses Kerns wirkt nur die Coulombkraft, die vom positiven Kern erzeugt wird und mit $1/r^2$ abfällt (dabei ist r der Abstand zum Mittelpunkt des Atomkerns).
- Der Kern mit der Ladung $Z e_0$ wird von Z Elektronen auf Kreisbahnen umlaufen mit Radien $r \approx 10^{-10}$ m.

Der Einfachheit wegen betrachten wir $(Z - 1)$ -fach ionisierte Atome, die Z Protonen und ein Elektron enthalten. Für das kreisende Elektron sind Coulombkraft und Fliehkraft gleich groß:

$$\frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{Z e_0^2}{r^2} = m_e \frac{v^2}{r} \quad Z = \text{Kernladungszahl} \quad (2.3-3)$$

mit der elektrischen Feldkonstanten

$$\epsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 c^2} \approx 8,854 \cdot 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{N m}^2}$$

und mit der Elektronenmasse $m_e = 9,109\,383\,56(11) \cdot 10^{-31} \text{ kg} \approx 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \approx 511 \text{ keV}/c^2$

$$\Rightarrow v^2 = \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{Z e_0^2}{m_e r} \quad (2.3-4)$$

Die gesamte Energie des Elektrons besteht aus kinetischer und potentieller Energie:

$$E = T + V = \frac{m_e}{2} v^2 - \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{Z e_0^2}{r}$$

Wir setzen v^2 aus Gl. (2.3-4) in diese Gleichung ein und erhalten die negative Elektronenenergie

$$E = -\frac{e_0^2}{4 \pi \epsilon_0} \frac{Z}{2 r} = \frac{1}{2} V = -T < 0 \quad (2.3-5)$$

Leider hat das Rutherford'sche Atommodell zwei gravierende Probleme:

- Im Rutherford'schen Atommodell sind die Energien nicht quantisiert. Daher sollte das Spektrum der emittierten Strahlung kontinuierlich sein.
- Die kreisenden Elektronen werden zum Mittelpunkt der Kreisbahn beschleunigt. Die Kreisbewegung ist die Überlagerung von zwei orthogonalen, harmonischen Schwingungen. *Nach*

7) Bei seinen klassischen Berechnungen hatte Rutherford das Glück des Tüchtigen: Für das Coulomb-Potential liefert die klassische Streutheorie dieselben Ergebnisse wie die zuständige, richtige Quantenmechanik.

den Gesetzen der Elektrodynamik strahlen beschleunigte Ladungen elektromagnetische Strahlung ab. Der Energieverlust müsste nach Gl. (2.3–5) zu einer ständigen Abnahme des Bahnradius r führen, so dass die Elektronen in weniger als 10^{-9} s spiralförmig in den Kern stürzen (siehe Aufgabe 2–5). Dies ist offensichtlich nicht der Fall.

Im Jahre 1913 schuf der dänische Physiker Niels Bohr das **Bohrsche Atommodell**. Er stellte drei *Postulate* auf:

- Die Elektronen bewegen sich auf bestimmten, sog. **stationären Bahnen** ohne Strahlung.
- Ein Elektron gibt eine elektromagnetische Strahlung mit der Frequenz f ab, wenn es von einer äußeren stationären Bahn mit Radius r_1 auf eine innere stationäre Bahn „springt“ mit einem kleineren Radius r_2 . Die Energie E der abgestrahlten Welle ist die Energiedifferenz des Elektrons auf beiden Bahnen und beträgt nach Gl. (2.3–5):

$$E = hf = E_{\text{Anf}} - E_{\text{End}} = \frac{Z e_0^2}{8 \pi \epsilon_0} \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right) \quad \text{mit } Z = \text{Kernladungszahl} \quad (2.3-6)$$

- Der Drehimpuls der Elektronenbahnen ist ein ganzzahliges Vielfaches von $\hbar$:

$$m_e r v = n \hbar = n \frac{h}{2 \pi} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.3-7)$$

Die Zahl n heißt **Quantenzahl**. Sie legt nach den folgenden Gln. (2.3–8/2.3–9) den Bahnradius und die Energie der stationären Bahnen fest.

Das dritte Postulat sorgt für die Quantisierung der Bahnradien und der Energie. Wir lösen Gl. (2.3–7) nach v auf, setzen v in die Gl. (2.3–4) ein und erhalten die diskreten Bahnradien:

$$r_n = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{Z e_0^2 m_e} n^2 \sim \frac{n^2}{Z} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.3-8a)$$

Der Radius des Grundzustandes ($n = 1$) des Wasserstoffatoms ($Z = 1$)

$$a_B = r_1 = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{e_0^2 m_e} = 5,291\,772\,106\,7\,(12) \cdot 10^{-11} \text{ m} \approx 5,292 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad (2.3-8b)$$

ist der sog. **Bohrsche Radius** a_B . Er wird bei anderen Autoren oft a oder a_0 genannt. Mit Gl. (2.3–5) folgt die Energie der n -ten Bahn⁸

$$E_n = -\frac{m_e c^2}{2} \left(\frac{Z e_0^2}{4 \pi \epsilon_0 \hbar c} \right)^2 \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.3-9)$$

8) Abgesehen von kleinsten Abweichungen, die in Abschn. 13.4 berechnet werden, stimmen die Energien in Gl. (2.3–9) mit Messergebnissen überein. In Kapitel 9 liefert die Schrödinger-Gleichung dieselben Energien.

Im Bohrschen Atommodell sind die Energiequantenzahl n und die Drehimpulsquantenzahl l identisch. In der Quantenmechanik hingegen gibt es zwei verschiedenen Quantenzahlen n, l mit $n = 1, 2, \dots$ und $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung des Wasserstoffatoms zeigen: Für die jeweils größten Drehimpulsquantenzahlen $l = n-1$ stimmen die Radien der größten radialen Wahrscheinlichkeitsdichte mit den Radien in Gl. 2.3–8 überein. Der Atomradius wird oft mit 0,1 nm grob abgeschätzt.

Mit der berühmten Sommerfeldschen **Feinstrukturkonstante**, der wichtigsten dimensionslosen Konstanten der ganzen Physik

$$\alpha := \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{\hbar}{m_e c} \frac{1}{a_B} \approx \frac{1}{137,035\,999\,139\,(31)} \approx \frac{1}{137,036} \quad (2.3-10)$$

lauten die Bohrschen Energien des Wasserstoffatoms ($Z = 1$)

$$E_n = -\frac{m_e c^2}{2} \alpha^2 \frac{1}{n^2} \approx -13,6 \text{ eV} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{für Wasserstoff} \quad (2.3-11)$$

Beispiel 2.3-1 Wasserstoffatom

Berechne für ein Elektron auf der n -ten Bahn des Wasserstoffatoms

a) den Radius r_n **b)** die Geschwindigkeit v_n **c)** die Umlaufzeit T_n

Lösung:

a) Der Radius r_1 der innersten Bahn wurde bereits in Gl. (2.3-8b) berechnet:

$$r_1 = a_B \approx 5,292 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,052\,92 \text{ nm} \quad (2.3-12)$$

Bei anderen, $(Z-1)$ -fach ionisierten Atomen mit nur einem Elektron ist der Bahnradius indirekt proportional zur Kernladungszahl Z . Nach Gl. (2.3-8a) gilt:

$$r_n = n^2 r_1 \quad (2.3-13)$$

b) Aus Gl. (2.3-7) folgt

$$v_1 = \frac{\hbar}{m_e r_1} = \alpha c \approx \frac{c}{137,036} = 2,189 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad \text{sowie} \quad v_n = \frac{1}{n} v_1 \quad (2.3-14/15)$$

Im Bohrschen Atommodell ist die Elektronengeschwindigkeit auf der innersten Bahn etwa 0,7 % der Lichtgeschwindigkeit. In guter Näherung kann man das Elektron daher als nichtrelativistisch ansehen. Extrem kleine relativistische Korrekturen sind aber erforderlich, sobald die Feinstruktur des Wasserstoffspektrums untersucht werden soll. Wir kommen darauf in Abschnitt „14.4 Feinstruktur des Wasserstoffatoms“ zurück.

$$\text{c) } T_1 = \frac{2\pi r_1}{v_1} = \frac{2\pi a_B^2 m_e}{\hbar} \approx 1,52 \cdot 10^{-16} \text{ s} \quad \text{sowie} \quad T_n = n^3 T_1 \quad (2.3-16/17)$$

Hinweis: Natürlich gilt im Bohrschen Atommodell das dritte Keplersche Gesetz: $T_n^2 \sim r_n^3$.

Wenn das Elektron des Wasserstoffatoms oder das *einzig*e Elektron, das nach $Z-1$ -facher Ionisierung eines schwereren Elementes (mit Protonenzahl $Z > 1$) übrig geblieben ist, von der n -ten Bahn auf eine kleinere m -te Bahn springt ($n > m$), so strahlt das Atom eine elektromagnetische

Welle mit folgender Energie und Wellenlänge λ ab:⁹

$$\Delta E_{n \rightarrow m} = E_n - E_m = \frac{hc}{\lambda} = \frac{m_e c^2}{2} \left(\frac{Z e_0^2}{4 \pi \epsilon_0 \hbar c} \right)^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{für } n > m \quad (2.3-18)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = Z^2 Ry \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

mit der Rydberg-Konstanten

$$Ry = \frac{m_e c}{2 \hbar} \left(\frac{e_0^2}{4 \pi \epsilon_0 \hbar c} \right)^2 \approx 1,097 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}} \quad (2.3-19)$$

Hier ist die Rydberg-Konstante keine *neue* Naturkonstante – wie in der Rydberg-Ritz-Gl. (2.3-1) –, sondern eine Funktion bereits bekannter Naturkonstanten.

Das Bohrsche Atommodell kann die Spektren von Atomen mit mehreren Elektronen nicht zutreffend berechnen. Nicht einmal für das zweitleichteste Element Helium (mit nur zwei Elektronen) liefert das Modell ein brauchbares Ergebnis. Zu anderen diskreten Energien – z. B. für den harmonischen Oszillator – macht die Bohrsche Theorie überhaupt keine Aussage.

Obwohl dem Bohrschen Atommodell völlig falsche und irreführende Vorstellungen von den Zuständen in der Atomhülle zugrunde liegen, hat es den Weg zum Aufbau der Quantenmechanik geebnet. Es hat sich in der Lehre – sowohl in der Schule als auch in Anfängervorlesungen – bis heute gehalten. Die Gründe dürften wohl in erster Linie die große historische Bedeutung an der Nahtstelle zwischen klassischer und Quantenphysik sowie die nur schwer verständlichen Lösungen der Schrödinger-Gleichung sein. Viele Physiker bedauern dieses Festhalten an anschaulichen, aber verkehrten Darstellungen; sie befürchten, dass diese unzulänglichen Beschreibungen und der Wunsch, überall anschauliche Bilder zu erhalten, die Fortentwicklung hemmen.

2.4 Welleneigenschaften der Materie 1924

Albert Einstein hatte 1905 bei der Erklärung des Photoeffektes postuliert, dass das Licht nicht nur Welleneigenschaften, sondern auch Teilcheneigenschaften hat. Danach besteht das Licht aus Lichtteilchen, den sog. **Photonen** mit der Energie

$$E = hf = \hbar \omega \quad (2.2-1)$$

9) Es war völlig unklar, wie man sich diesen Sprung vorstellen sollte. Heisenberg schrieb: „Denn wir berechnen zwar eine Bahn nach der klassischen Newtonschen Mechanik, dann aber geben wir ihr durch die Quantenbedingungen eine Stabilität, die sie nach eben dieser Newtonschen Mechanik nie besitzen dürfte; und wenn das Elektron bei der Strahlung von einer Bahn in die andere springt, so sagen wir lieber gar nichts mehr darüber, ob das Elektron hier Weitsprung oder Hochsprung oder sonst irgendwas Schönes macht. Also muss doch die ganze Vorstellung von der Bahn des Elektrons im Atom Unsinn sein. Aber was dann?“ Letztendlich kam Heisenberg zu der Einsicht, dass man nicht nach den Elektronenbahnen fragen darf. *Nach Heisenberg darf eine Theorie nur Größen enthalten, die man im Experiment beobachten kann.*

Die moderne, seit den 1970er Jahren entwickelte Dekohärenz-Theorie (siehe Abschn. 22.4) zeigt, dass es keine diskreten Quantensprünge gibt, sondern nur stetige Prozesse, die durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung gesteuert werden und die bei Wechselwirkungen mit den Messgeräten und der Umgebung so extrem schnell ablaufen können, dass sie als Quantensprünge erscheinen.

Im Jahre 1924 machte Louis de Broglie in seiner Doktorarbeit den bahnbrechenden Vorschlag, dass *umgekehrt* Quantenobjekte, die bis dahin eindeutig als Teilchen angesehen wurden, auch Welleneigenschaften haben (Nobelpreis 1929). Danach sollte z. B. für Elektronen gelten:

- Bei der Ausbreitung verhalten sich Elektronen wie Wellen – sog. **Materiewellen** –, die mehr oder weniger breit verschmiert sind und Interferenz und Beugung zeigen.
- Bei der Wechselwirkung mit Materie reagieren Elektronen *lokal* wie Teilchen und übertragen Energie und Impuls.

De Broglie forderte folgende Zusammenhänge zwischen den beiden mechanischen Größen E , p (p = Impuls) einerseits und den Wellengrößen $\omega = 2\pi/T$, $k = 2\pi/\lambda$ andererseits:

$$E = hf = \hbar \omega \quad (2.4-1a)$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Wellenzahl } k=2\pi/\lambda}}{=} \quad \hbar k \quad (2.4-1b)$$

De Broglie konnte die **de-Broglie-Gleichungen** nicht beweisen, aber teilweise mit Gleichungen der relativistischen Mechanik plausibel machen.¹⁰ Damit konnte er das Bohrsche Quantenpostulat

$$m_e r v = n \hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.3-7)$$

für den Drehimpuls des Elektrons im Wasserstoffatom wunderbar veranschaulichen:

$$2\pi r \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Gl. (2.3-7)}}}{=} \frac{n \hbar}{m_e v} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Gl. (2.4-1b)}}}{=} n \lambda \quad (2.4-2)$$

10) Die Gln. (2.4–1a/b) gelten auch im relativistischen Bereich. Nach der speziellen Relativitätstheorie gilt für die Energie E , den Impuls p und die Ruheenergie $m_0 c^2$ eines massiven, *freien* Teilchens ($V = 0$):

$$E = \sqrt{(m_0 c^2)^2 + (pc)^2}$$

Für Photonen mit verschwindender Ruhemasse $m_0 = 0$ folgt

$$E_{\text{Photon}} = pc \quad \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Quantentheorie}}}{=} \quad hf \quad \Rightarrow \quad p = h/\lambda$$

Die Vorschläge von de Broglie waren 1924 äußerst gewagt. Die meisten Physiker lehnten die Thesen strikt ab und die Doktorarbeit drohte zu scheitern. Schließlich bat Langevin, ein Mitglied des Prüfungsausschusses der Pariser Sorbonne, Einstein um eine Bewertung. Einstein schrieb nach seiner Begutachtung in einem Brief an Max Born: „Das musst du gelesen haben. Wenn es auch verrückt aussieht, so ist es doch durchaus gediegen“. Am Ende wurde die Doktorarbeit wegen Einsteins positiver Bewertung angenommen – zum Glück, denn fünf Jahre später erhielt de Broglie den Nobelpreis.

Auch Max Planck war anfangs sehr erstaunt. Er berichtete später: „Die Kühnheit dieser Idee war so groß – ich muss aufrichtig sagen, dass ich selber auch damals den Kopf schüttelte. Ich erinnere mich sehr gut, dass Herr Lorentz mir damals im vertraulichen Privatgespräch sagte: „Diese jungen Leute nehmen es doch gar zu leicht, alte physikalische Begriffe beiseite zu schieben!““